

Upřesňování jako nezbytný nástroj při studiu vazby mezi proteinem a ligandy

Rentgenová strukturní analýza umožňuje studovat vazby mezi ligandem a proteinem na atomární úrovni, čímž může nejen významně přispět k objasnění funkce studovaného proteinu, ale i identifikovat jeho potenciální inhibitory. Tato práce se věnovala dvěma komplexům ligandu s nukleasou ze *Stenotrophomonas maltophilia*. Především pak upřesňování strukturních modelů a vlivu upřesňování na nalezení pozice ligandu v aktivním místě této nukleasy. Postupným upřesňováním strukturních modelů bylo možné přesně identifikovat místo a způsob vazby studovaných ligandů. Správnost určení pozice ligandu byla diskutována vzhledem k mapám elektronové hustoty vypočteným několika způsoby.

Primary author: ŠPELDOVÁ, Karolína (CTU FNSPE)